

強相関超伝導状態に対する不純物ポテンシャルの影響

著者	佐藤 諒
号	88
学位授与機関	Tohoku University
学位授与番号	理博第3254号
URL	http://hdl.handle.net/10097/00128507

論文内容要旨

(NO. 1)

氏名	佐藤 諒	提出年	令和元年
学位論文の 題目	強相関超伝導状態に対する不純物ポテンシャルの影響		

論文目次

第1章 研究背景と目的

- 1.1 はじめに
- 1.2 銅酸化物高温超伝導体
- 1.3 銅酸化物における不純物効果
- 1.4 モット絶縁体
- 1.5 tJ 模型における二種類の相分離
- 1.6 本研究の目的

第2章 理論模型

- 2.1 不純物項を含むハバード模型の概要
- 2.2 tJ 模型の概要

第3章 解析手法

- 3.1 変分モンテカルロ法
- 3.2 解析手法の手順
- 3.3 試行波動関数
- 3.4 分析する物理量

第4章 結果と考察

- 4.1 強相関超伝導に対する不純物の影響
- 4.2 tJ 模型における相分離

第5章 結論

- 5.1 不純物効果が強相関超伝導状態に及ぼす影響
- 5.2 tJ 模型における相分離

付録A 変分モンテカルロ法

参考文献

研究業績

謝辞

要旨

研究背景

強相関電子系において単一バンドのハーフフィリングの状態に電荷キャリアがごく少量でもドーピングされた場合、モット絶縁体相が崩れ、そこから超伝導相が出現する。これが理論模型の計算から得られる結果である。しかし実際の物質ではある程度の有限ドーピング率までモット絶縁体相が残存し、理論研究とは異なる実験結果が得られていた。この実験で調べられた実際の物質には不純物が含まれており、均質系に対する(不純物が無い)理論模型の解析から得られる結果との違いは不純物効果によって生じている可能性が高い。すなわち、ハーフフィリングと低ドーピング領域において出現するモット絶縁体相からさらなるドーピングにより出現する超伝導相の推移は実際の系に存在する不純物効果が密接に関わっている可能性が十分にある。また不純物効果の入った模型の理論計算では弱相関領域のものやポテンシャル強度がランダムなもの、不純物数が一個などのきつい制約のあるものが多かった。さらに強相関領域で信頼のおける計算は難しく、複数の不純物が系に含まれる状況での強相関物理は未だに謎の部分が多く残っている。

研究目的

本研究では不純物効果が超伝導状態に及ぼす影響を調べる。そのために強相関超伝導が出現する模型の中でも多用されているハバード模型に不純物項を取り入れたもの(不純物ハバード模型)を解析する。不純物ハバード模型は

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} + V \sum_{i\sigma}^{N_{\text{imp}}} n_{i\sigma}$$

と表される。ホッピングパラメーター $t_{i,j}$ は最近接 t と次近接 t' とする。第三項が点型不純物項であり、不純物ポテンシャルの大きさが V である。このとき不純物を設置するサイトはランダムに N_{imp} 個選ぶ。

計算手法

本研究では変分モンテカルロ法を用いて上記模型の計算を行う。変分モンテカルロ法は強相関電子系の解析に適しており、強相関領域で重要となる局所的な電子配置による波動関数の重みの変化を数値的に厳密に計算することができる。実際に適用する試行波動関数はジャストロータイプを採用し、一体部分では不純物ポテンシャルにより並進対称性が破られた状況であっても超伝導状態を扱えるようにBdG方程式を解くことによって得られる波動関数を採用する。さらに強相関効果が取り入れられるように、実空間の配置に依存して波動関数の大きさを調整する多体部分を採用する。このとき多体部分には不純物サイトの電子密度に応じて波動関数の重みを調整する一体因子も含める。

計算結果

結果は多岐にわたるのでここでは一例として強相関領域の典型値 $U/t = 12$ の場合にドーピング率を不純物濃度に一致させた場合 ($\delta = \delta_{\text{imp}} = 0.08$) の結果を見ていく。図1はドーピングされたハバード模型で主に出現する d 超伝導の相関関数 P_d とまた試行波動関数内の対生成ギャップに相当する変分パラメーターである Δ_d の V/t 依存性について示したものである。不純物ポテンシャルが小さい領域 ($|V/t| \leq 4$) では、 P_d に対する影響は弱く、超伝導が不純物の無い状況と比べて同程度に出現している。しかし、 $V/t \geq 5$ の領域では P_d が消失し、 Δ_d のみが残る結果となる。これはハーフフィリングにおける状況である P_d がゼロ (インコヒーレント) で、最近接のスピンの反平行の配置をした状態で実空間に散らばっている状態 (RVB) が実現して、 Δ_d のみが有限に残る結果と酷似している。この結果により、不純物ポテンシャルが正側に大きい場合 ($V/t \geq 5$)、(モット) 絶縁体相が出現すると考えられる。さらにこの状況をより明らかにするために不純物サイトの電子密度 (n_{imp}) と不純物以外のサイトであるホストサイトの電子密度 (n_{hst}) の V/t 依存性を図2

に示した。不純物ポテンシャルが0 の点では n_{hst} 、 n_{imp} 共に同じ電子密度 $n_{\text{hst}} = n_{\text{imp}} = 0.92$ であるが、 $V/t \geq 5$ の領域では n_{imp} がゼロに収束し、その代わりに、 n_{hst} が1に収束する。この様子を模式図として表現したものが図3である。 V/t が小さい場合 (図3 (a))、電子が不純物サイトの影響をそれほど受けず比較的自由に移動できる (伝導状態)。しかし、 V/t が大きい場合 (図3 (b))、電子が不純物サイトに入ることが困難になり、ほとんど全ての電子が、ホストサイトに入る。ホストサイトでは電子相関のため、各サイトの電子密度が1 になり、伝導はホストサイトで起こるためモット絶縁体状態を形成する。

結論

強相関領域であれば、不純物ポテンシャルが大きく ($V/t \geq 5$)、ドーピング率と不純物濃度が一致していればモット絶縁体相が有限ドーピング率まで保たれることが分かった。

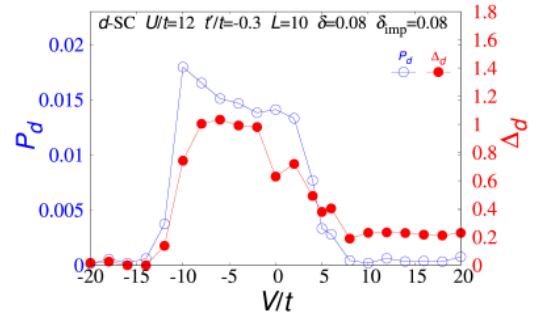


図 1: d 波超伝導相関関数 P_d と対生成ギャップに相当する最適化変分パラメーター Δ_d の V/t 依存性。ドーピング率 (δ) は不純物濃度 (δ_{imp}) と同じ場合 ($\delta = \delta_{\text{imp}} = 0.08$)。

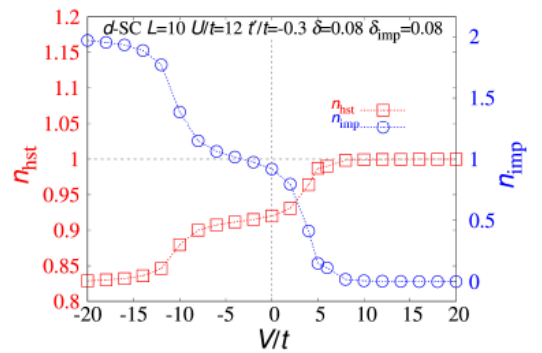


図 2: 不純物サイトの電子密度 (n_{imp}) とホストサイトの電子密度 (n_{hst}) の V/t 依存性。 $\delta = \delta_{\text{imp}} = 0.08$ である。

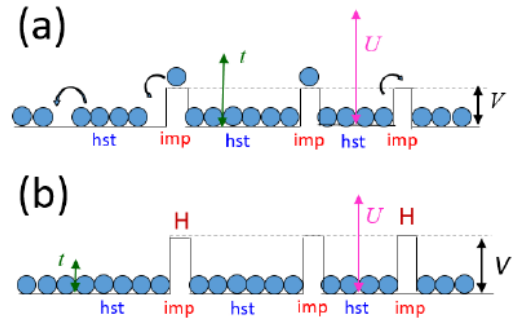


図 3: $\delta_{\text{imp}} = \delta$ の場合におけるモット転移機構の模式図。不純物サイト (imp) とホストサイト (hst) 上の典型的な電子配置を示してある。(a) は V/t が小さい領域での描像。(b) は V/t 大きい領域での描像。

別 紙

論文審査の結果の要旨

論文題名

強相関超伝導状態に対する不純物ポテンシャルの影響

本博士論文は強相関電子系における金属絶縁体転移と異方的超伝導に対する不純物効果について理論的な解析を行ったものである。銅酸化物超伝導体では、ハーフフィリングの絶縁体状態に電子あるいは正孔をドーピングすると超伝導が発現する。このようなキャリアドーピングは、一般に元素置換を必要とし、その結果としてポテンシャルの乱れが系に導入される。このポテンシャルの乱れと強い電子間相互作用の両者を適切に理論計算に取り入れることは困難であり、これまでの理論解析で明らかとなっていることは極めて限られていた。

本論文の著者は、電子間相互作用を取り扱う最も基本的なモデルであるハバードモデルにおいて様々な形態の不純物を導入したモデルを考え、これを電子間相互作用と不純物効果の両方を取り扱うことのできる変分モンテカルロ法を用いて解析した。その結果、不純物の影響により有限のキャリア数においてもモット絶縁体状態が実現すること、モット絶縁体近傍で生じる超伝導において、不純物の導入はキャリア数の制御という形で影響を与えることを、数値的に明らかにした。

これらの研究は強相関電子系の研究分野において新しい展開をもたらすものであり、著者が自立して研究活動を行うに必要な高度の研究能力と学識を有することを示している。したがって、佐藤諒提出の博士論文は博士（理学）の学位論文として合格と認める。